

# ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА АГРЕГАЦИИ ИНГИБИТОРА ВНХ-Л-49 МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ

*Ермолаева А.П., Ширококов И.Б.*

Удмуртский государственный университет  
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, д. 1

Защитное действие поверхностно-активных веществ (ПАВ) часто определяется их взаимодействием с коррозионной средой с образованием ионных и мицеллярных растворов. В последние десятилетия в изучении мицеллярных растворов ПАВ можно выделить два основных подхода: первый – использование физико-химических методов и второй – вычислительный эксперимент.

Целью данной работы является исследование процесса агрегации ингибитора ВНХ-Л-49 (производитель: ОАО «Всероссийский научно-исследовательский институт нефтехимических процессов», Санкт-Петербург) в полярном (вода) и неполярном (циклогексан) растворителях с использованием метода молекулярной динамики.

Основные молекулярно-динамические расчёты выполнялись с использованием программ: GROMACS (v.4.5.3.) с использованием силового поля GMX и модели воды SPC. Первоначальные структуры молекул ингибиторов и циклогексана были созданы с помощью сервиса PRODGR [<http://davapc1.bioch.dundee.ac.uk/cgi-bin/prodrg>].

Анализ строения одиночной молекулы ВНХ-Л-49 показывает, что длины химических связей соответствуют: C–N – 0,147 нм, C=N – 0,134 нм. В циклогексановом кольце длина связи C–C равна 0,152 нм. В ароматическом кольце длина связи C–H равна 0,109 нм, а связь между атомом C и фенильной группой, а так же в между атомами углерода в ароматическом кольце равна 0,139 нм. Валентные углы: C–N=C имеет величину 122 °, угол C–C–C соответствует 109.5°, а значение угла C=C–C равно 120°. Атом азота оттягивает электронную плотность на себя.

Аналогично с использованием сервиса PRODGR была создана молекула неполярного растворителя циклогексана в которой валентный угол между атомами C–C–C составляет 109.5°, а длина связи C–C равна 0,152 нм.

В цели настоящей работы входило изучение процесса агрегатирования системы из 256 молекул ВНХ-Л-49 в воде и циклогексане. Модельные системы создавались из представления, что они имитируют растворы, в которых на каждую молекулу ВНХ-Л-49 приходилось 1:50, 1:100, 1:200, 1:400, 1:800 молекул растворителя. При этом температур-

ный интервал варьировался от температуры замерзания до температуры кипения чистого растворителя и делился на три интервала.

По результатам молекулярно-динамических расчётов для растворов ВНХ-Л-49 в циклогексане агрегация молекул ингибитора практически не наблюдается даже в области концентрированных растворов. Есть небольшие ассоциаты только при соотношении 1:50.

В полярном растворителе (вода) происходит существенное агрегатирование систем по сравнению с системами, находящимися в циклогексане. Так же можно отметить, что для водных растворов характерно снижение чисел агрегаций, как с разбавлением раствора, так и с уменьшением температуры.

По результатам расчётов для водных систем были найдены числа агрегации, что позволило оценить изменение термодинамических параметров (энтальпии, энтропии, энергии Гиббса) моделируемых систем в процессе агрегатирования.

## **ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ, СОДЕРЖАЩИХ L-ЦИСТЕИН И СОЛИ СЕРЕБРА**

*Адамян А.Н., Перезовова Т.В., Пахомов П.М., Хижняк С.Д.*

Тверской государственный университет

170100, Тверь, ул. Желябова, д. 33

В течение последних лет гидрогели на основе природных полимеров стали очень востребованы в биомедицинских и пищевых целях. А гелеобразование на основе низкомолекулярных низкоконцентрированных соединений (например, аминокислот, нуклеотидов, липидов и др.) используются реже ввиду их ограниченного производства. Супрамолекулярные гели на основе L – цистеина и нитрита серебра благодаря антибактериальным и цитостатическим свойствам с успехом могут найти применение в фармакологии и таких сферах медицины, как офтальмология (изготовление контактных линз), онкология.

В работе открыто гелеобразование в низкоконцентрированных водных растворах (3,0 мМ) в системе L-цистеин – нитрит серебра, и с помощью различных физико-химических методов (ультрафиолетовая (УФ) спектроскопия, динамическое светорассеяние (ДСР), оптическая микроскопия) изучены строение гелей и условия их образования.

Установлено, что в результате смешивания растворов исходных компонентов (концентрация - 1,0 мМ) в соотношениях 1:1 и 1:1,25 образуется прозрачный или слегка опалесцирующий раствор, который при